



①9 BUNDESREPUBLIK
DEUTSCHLAND



DEUTSCHES
PATENTAMT

⑫ Offenlegungsschrift
⑩ DE 40 17 317 A 1

⑤1 Int. Cl.⁵:
G 01 J 3/28
// H 04 N 3/10, 3/15

②1 Aktenzeichen: P 40 17 317.8
②2 Anmeldetag: 30. 5. 90
④3 Offenlegungstag: 5. 12. 91

DE 40 17 317 A 1

⑦1 Anmelder:

Bodenseewerk Perkin-Elmer GmbH, 7770
Überlingen, DE

⑦4 Vertreter:

Weisse, J., Dipl.-Phys.; Wolgast, R., Dipl.-Chem. Dr.,
Pat.-Anwälte, 5620 Veibert

⑦2 Erfinder:

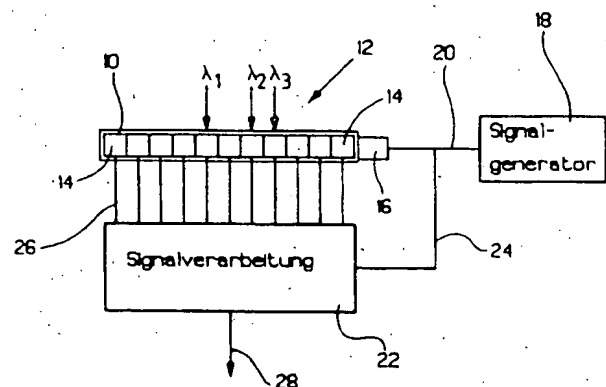
Wulf, Jürgen, Dipl.-Phys. Dr., 7770 Überlingen, DE

⑤6 Für die Beurteilung der Patentfähigkeit
in Betracht zu ziehende Druckschriften:

DE	34 03 372 C1
US	42 53 765
EP	03 20 530 A1
WO	90 05 286

⑤4 Anordnung zur Verbesserung der Auflösung eines Spektrometers

⑤7 Zur Verbesserung der Auflösung eines Spektrometers, bei dem durch ein Gitter o. dgl. ein Spektrum (12) auf einen Reihendetektor (10) erzeugt wird, wird das Spektrum periodisch in definierter Weise relativ zu den Detektorelementen des Reihendetektors verlagert. Von den Detektorsignalen und Verlagerungssignalen ist eine Signalverarbeitung (22) beaufschlagt zur Darstellung eines Spektrums hoher Auflösung aus den Abhängigkeiten der Detektorsignale von den Verlagerungssignalen.



DE 40 17 317 A 1

Die Erfindung betrifft eine Anordnung zur Verbesserung der Auflösung eines Spektrometers, bei dem durch dispergierende, optische Mittel ein Spektrum auf einem Reihendetektor mit einer Reihe von Detektorelementen erzeugt wird.

Zugrundeliegender Stand der Technik

Es sind Spektrometer bekannt, bei denen ein Eintrittsspalt über ein Dispersionsgitter und abbildende, optische Mittel spektral zerlegt in der Ebene eines Reihendetektors (Dioden-Arrays) als Spektrum abgebildet wird. Das Spektrum erstreckt sich längs dieses Reihendetektors. Jedes Detektorelement erfaßt dabei einen bestimmten engen Wellenlängenbereich des Spektrums. Es kann daher das gesamte Spektrum in einem ziemlich großen Bereich von Wellenlängen gleichzeitig erfaßt werden. Das ist ein Vorteil gegenüber einem Monochromator mit einem einzigen Detektor, bei welchem jeweils nur ein einziger, enger Wellenlängenbereich erfaßt wird und die verschiedenen Wellenlängen eines Spektrums nacheinander abgetastet werden müssen. Ein solches Spektrometer mit Reihendetektor ist besonders dort von Vorteil, wo ein Spektrum schnell erfaßt werden muß. Ein Beispiel für die Anwendung eines solchen "Polychromators" ist ein Detektor für die Flüssigkeits-Chromatographie.

Ein solcher Polychromator ist beispielsweise beschrieben in der DE-C 35 44 512.

Das Auflösungsvermögen solcher Spektrometer ist begrenzt durch die endliche Fläche der Detektorelemente. Jedes Detektorelement erfaßt dadurch die Strahlung aus einem endlichen Wellenlängenbereich und integriert den Intensitätsverlauf über diesen Wellenlängenbereich. Das Spektrometer liefert nicht einen kontinuierlichen Verlauf von Intensität über Wellenlänge sondern eine Folge von ggf. einer großen Anzahl diskreter Werte. Diese Beschränkung der Auflösung kann dazu führen, daß dicht benachbarte Spektrallinien nicht mehr aufgelöst werden. Das gilt auch, wenn die Detektorelemente praktisch ohne Zwischenräume unmittelbar aneinandergrenzen, was bei der Verwendung von z. B. Photodioden möglich ist.

Es ist versucht worden, die Auflösung solcher Spektrometer mit Reihendetektor dadurch zu verbessern, daß die einzelnen Detektorelemente entsprechend klein ausgeführt werden. Das ist recht aufwendig und führt nur mit Einschränkungen zum Ziel. Außerdem wird mit weiterer Verkleinerung der Detektorelemente auch die von jedem einzelnen Detektorelement erfaßte Nutzenergie entsprechend verringert.

Es sind ladungsgekoppelte Mosaikdetektoren bekannt, bei denen zwischen den einzelnen Detektorelementen technisch bedingt Zwischenräume gebildet sind. Solche zweidimensionalen Mosaikdetektoren werden insbesondere in Fernsehkameras benutzt. Um bei solchen Fernsehkameras die Bildauflösung zu verbessern, sind Bildversatzmittel vorgesehen, durch welche das Bild periodisch relativ zu dem Mosaikdetektor verschoben wird. Dadurch erfaßt der Satz von ladungsgekoppelten Detektorelementen während aufeinanderfolgender Integrationsperioden unterschiedliche Bereiche des Bildes (1982 SID INTERNATIONAL SYMPOSIUM

DIGEST OF TECHNICAL PAPERS, Society for SID Information Display, 1. Ausgabe, Mai 1982, Seiten 288-289).

Die EP-A-1 31 387 und die EP-A-65 885 zeigen Anordnungen, bei welchen Mosaikdetektoren zur Erhöhung der Auflösung jeweils auf einem zu Schwingungen erregten Träger angeordnet sind. Auch die JP-A-56 27 571 zeigt einen Mosaikdetektor, der zur Lichteinfallsrichtung geneigt ist und eine Bewegung zur Erhöhung der Auflösung ausführt.

Die EP-A-1 33 890 zeigt ein hochauflösendes, elektrooptisches Empfangssystem zur Erzeugung elektronischer Bildinhalte für die digitale Bildverarbeitung. Auch dort wird ein als ladungsgekoppelter Bauteil ausgebildeter Mosaikdetektor vorgesehen. Um die Zwischenräume zwischen den Detektorelementen zu überdecken, wird dort das Gesichtsfeldbild periodisch längs einer geschlossenen Bahn verlagert. Die so nacheinander erhaltenen Bildinformationen werden gespeichert. Daraus wird ein hochaufgelöstes, elektronisches Bild für die digitale Bildverarbeitung gewonnen.

In allen diesen Fällen geht es um die Aufnahme eines Bildes. Es geht darum, Lücken zwischen Detektorelementen zu überbrücken. Aus so gespeicherten Informationen wird das Bild mit praktisch lückenlos aneinanderschließenden Bildelementen zusammengesetzt.

Offenbarung der Erfindung

Der Erfindung liegt die Aufgabe zugrunde, bei einem Spektrometer mit einem Reihendetektor die Auflösung zu verbessern.

Insbesondere sollen auch dicht benachbarte Linien eines Spektrums noch aufgelöst werden, ohne daß die einzelnen Detektorelemente unerwünscht klein gemacht zu werden brauchen.

Erfindungsgemäß wird diese Aufgabe gelöst durch

- a) Mittel zur definierten periodischen Verlagerung des Spektrums relativ zu den Detektorelementen des Reihendetektors,
- b) Mittel zur Erzeugung von Verlagerungssignalen nach Maßgabe der Verlagerung und
- c) von den Detektorsignalen der Detektorelemente und den Verlagerungssignalen beaufschlagte Signalverarbeitungsmittel zur Darstellung eines Spektrums hoher Auflösung aus den Abhängigkeiten der Detektorsignale von den Verlagerungssignalen.

Im Gegensatz zu den zum Stand der Technik diskutierten ladungsgekoppelten Mosaikdetektoren schließen sich bei einem Reihendetektor in einem Spektrometer die Detektorelemente dicht aneinander an. Es brauchen also keine Lücken oder Zwischenräume überbrückt zu werden. Dafür gilt es, eine Funktion Intensität über Wellenlänge möglichst genau zu erfassen, nicht nur eine Bildstruktur. Jedes Detektorelement liefert ein Integral der Intensität über der Wellenlänge mit bestimmten Integrationsgrenzen. Durch die Relativverlagerung von Reihendetektor und Spektrum werden diese Integrationsgrenzen in definierter Weise verändert. Aus dem dabei an jedem Detektorelement erhaltenen Signalverlauf kann der Verlauf der Intensität als Funktion der Wellenlänge rekonstruiert werden. Es ergibt sich so ein Spektrometer mit hoher Auflösung.

Ausgestaltungen der Erfindung sind Gegenstand der Unteransprüche.

Einige Ausführungsbeispiele der Erfindung sind nach-

stehend unter Bezugnahme auf die zugehörigen Zeichnungen näher erläutert.

Kurze Beschreibung der Zeichnungen

Fig. 1 ist eine schematische Darstellung einer Anordnung mit einem in definierter Weise relativ zu einem Spektrum beweglichen Reihendetektor.

Fig. 2 ist eine schematische Darstellung und zeigt den Reihendetektor in zwei verschiedenen Stellungen relativ zu dem ortsfesten Spektrum.

Fig. 3 ist eine schematische Darstellung eines Spektrometers mit einem Reihendetektor, einem Gitter und einem quer zur Bündelachse periodisch beweglichen Eintrittsspalt.

Fig. 4 ist eine schematische Darstellung eines Spektrometers mit einem Reihendetektor und einem periodisch verschwenkbaren Gitter.

Fig. 5 ist eine schematische Darstellung eines Spektrometers mit einem Reihendetektor, einem abbildenden Gitter und einem in Richtung der Bündelachse periodisch beweglichen Eintrittsspalt.

Fig. 6 zeigt in übertriebener Darstellung die Schärfefläche der Abbildung im Verhältnis zur Ebene des Reihendetektors bei dem Spektrometer von Fig. 5 bei einer Ausgangsstellung des Eintrittsspalt.

Fig. 7 zeigt in übertriebener Darstellung die Schärfefläche der Abbildung im Verhältnis zur Ebene des Reihendetektors bei dem Spektrometer von Fig. 5 bei einer etwas verschobenen Stellung des Eintrittsspalt.

Bevorzugte Ausführungen der Erfindung

In Fig. 1 ist schematisch eine Anordnung dargestellt, bei welcher ein Reihendetektor 10 relativ zu dem stationären Spektrum 12 bewegt wird. Der Reihendetektor 10 besteht aus einer linearen Anordnung von Detektorelementen 14 in Form von Photodioden. Die Detektorelemente 14 schließen sich praktisch lückenlos aneinander an. Die Detektorelemente haben aber natürlich endliche Abmessungen. Das Spektrum 12 ist in Fig. 1 durch drei Wellenlängen 1, 2, 3 symbolisiert. Jedes Detektorelement 14 erfaßt Strahlung aus einem endlichen Wellenlängenbereich. Das von dem einzelnen Detektorelement gelieferte Detektorsignal entspricht daher dem Integral der Intensitäten des Spektrums 12 über den von der Breite des Detektorelements 14 bestimmten Wellenlängenbereich.

Der Reihendetektor 10 wird von einem Piezoelement 16 periodisch in seiner Längsrichtung, waagrecht in Fig. 1, bewegt. Zu diesem Zweck liefert ein Signalgenerator 18 ein Verlagerungssignal an einem Ausgang 20. Dem Verlagerungssignal null entspricht eine Ruhestellung des Reihendetektors 10. Die Auslenkung des Reihendetektors 10 aus dieser Ruhestellung ist proportional zu dem Verlagerungssignal.

Mit 22 sind signalverarbeitende Mittel bezeichnet. Die signalverarbeitenden Mittel sind vorzugsweise von einem Digitalrechner gebildet. Auf die signalverarbeitenden Mittel 22 ist einmal über Leitung 24 das Verlagerungssignal aufgeschaltet. Zum anderen erhalten die signalverarbeitenden Mittel 22 die Signale von den Detektorelementen 14 über Eingänge 26. Die signalverarbeitenden Mittel erhalten somit eine Folge von diskreten Detektorsignalen. Die Detektorsignale ändern sich aber in Abhängigkeit von den Verlagerungssignalen und der dazu proportionalen Auslenkung des Reihendetektors 10 aus seiner Ruhestellung. Die signalverarbei-

tenden Mittel 22 berechnen daraus den stetigen Verlauf der Intensität des Spektrums 12 als Funktion der Wellenlänge. Dieser Verlauf wird in geeigneter Weise an einem Ausgang 28 ausgegeben.

Es können dadurch auch eng benachbarte Linien eines Spektrums 12 aufgelöst werden.

Fig. 2 veranschaulicht die Bewegung des Reihendetektors 10 relativ zu dem Spektrum 12. Oben in Fig. 2 ist der Reihendetektor 10 in seiner Ruhelage dargestellt. Unten in Fig. 2 ist der Reihendetektor 10 in ausgelenktem Zustand dargestellt. Die Amplitude der Auslenkung ist nicht größer als die Breite des Reihendetektors 10.

Bei der Ausführung nach Fig. 3 fällt ein Lichtbündel von einem Eintrittsspalt 30 auf ein feststehendes Gitter 32. Das Gitter 32 stellt dispersierende Mittel dar und erzeugt gleichzeitig ein spektral zerlegtes Bild des Eintrittsspalt 30 auf einem Reihendetektor 34. Wie durch den Doppelpfeil 36 angedeutet ist, wird der Eintrittsspalt 30 periodisch quer zu der Bündelachse des Lichtbündels 38 bewegt.

Wenn

φ der Winkel zwischen dem einfallenden Lichtbündel 38 und der Gitternormalen 40,

ψ der Winkel gegenüber der Gitternormalen 40 ist, unter welchem Licht von der Wellenlänge in m-ter Ordnung von dem Gitter zu dem Reihendetektor hin gebeugt wird,

g die Gitterkonstante und

m die Ordnung

ist, dann ergibt sich aus der Gittergleichung:

$$\sin \varphi + \sin \psi = \frac{m\lambda}{g} \quad (1)$$

Bei einer Verlagerung des Eintrittsspalt um eine Strecke Δx , entsprechend einer Änderung des Einfallswinkels φ um $d\varphi$ ergibt sich für die Verlagerung $d\lambda$ der Wellenlänge λ des Spektrums relativ zu dem stillstehenden Reihendetektor 34:

$$d\lambda = \frac{g}{m} \cos \varphi d\varphi \quad (2)$$

Auch hier läßt sich aus den Verlagerungssignalen und den Detektorsignalen ähnlich wie bei Fig. 1 der wahre Verlauf der Intensität als Funktion der Wellenlänge berechnen.

Bei der Ausführung nach Fig. 4 fällt ein Lichtbündel 42 von einem Eintrittsspalt 44 auf ein Gitter 46. Das Lichtbündel 42 bildet mit der Gitternormalen 48 einen Winkel φ . Licht einer bestimmten Wellenlänge λ wird von dem Gitter 46 zu einem Lichtbündel 50 gebeugt. Das Lichtbündel 50 bildet mit der Gitternormalen 48 einen Winkel ψ . Das Gitter 46 bildet den Eintrittsspalt 44 spektral zerlegt in der Ebene eines Reihendetektors 52 ab. Das Gitter 46 wird periodisch um eine Achse 54 verschwenkt. Die Winkelhalbierende zwischen einfallendem Lichtbündel 42 und gebeugtem Lichtbündel 50 ist mit 55 bezeichnet und bildet mit der Gitternormalen den Winkel α . Der gesamte Umlenkwinkel zwischen einfallendem und gebeugtem Strahl wird mit ϵ bezeichnet. In Ruhestellung des Piezoelements 56 sind für jedes Pixel die Werte für φ , ψ bzw. ϵ , α bekannt bzw. festgelegt.

Wenn

ε der konstante Umlenkwinkel zwischen einfallendem und gebeugtem Lichtbündel 42 bzw. 50, φ der Einfallswinkel des Lichtbündels 42, ψ der Beugungswinkel für eine Wellenlänge λ und α der Gitterdrehwinkel ist, um den das Gitter aus der nullten Ordnung verdreht werden muß, um unter dem Winkel ψ die Wellenlänge λ zu erhalten,

dann wird aus der Gittergleichung (1):

$$2 \sin \alpha \cos \frac{\varepsilon}{2} = \frac{m \lambda}{g} \quad (3)$$

Ändert sich der Gitterdrehwinkel α infolge der periodischen, kleinen Schwingbewegung des Gitters 46 um einen kleinen Winkel $d\alpha$, dann ändert sich die unter dem Winkel ψ beobachtete Wellenlänge um einen Betrag

$$d\lambda = \frac{g}{m} \cdot 2 \cos \frac{\varepsilon}{2} \cos \alpha d\alpha \quad (4)$$

Statt der Wellenlänge λ wird unter dem Winkel ψ dann eine Wellenlänge

$$\lambda' = \lambda + \frac{g}{m} \cdot 2 \cos \frac{\varepsilon}{2} \cos \alpha d\alpha \quad (5)$$

beobachtet. Für andere Detektorelemente ergibt sich ein anderes ε , anderes α und dementsprechend auch ein anderes $d\lambda$.

Wie aus Fig. 4 ersichtlich ist, wird auch bei dieser Ausführung die periodische Bewegung des Gitters 46 durch ein Piezoelement 56 eingeleitet. Der Winkel $d\alpha$ kann leicht aus dem Weg dx des Piezoelements 56 und dem Hebelarm berechnet werden. Das Piezoelement 56 wird wieder von Verlagerungssignalen eines Signalgenerators 58 angesteuert. Die Verlagerungssignale sind außerdem auf signalverarbeitende Mittel 60 aufgeschaltet. Die signalverarbeitenden Mittel 60 erhalten auch die Detektorsignale von den Detektorelementen 62 des Reihendetektors 52. Aus diesen Signalen und ihren Änderungen berechnen die signalverarbeitenden Mittel wieder die Abhängigkeit der Intensität des Spektrums von der Wellenlänge. Die Abhängigkeit der Wellenlängenänderung $d\lambda$ von α kann bei dieser Rechnung berücksichtigt werden.

Bei der Ausführung nach Fig. 5 ist ein Gitter 64 feststehend angeordnet. Ein Lichtbündel 66 fällt durch einen Eintrittsspalt 68 auf das Gitter 64. Das Lichtbündel 66 bildet mit der Gitternormalen 70 einen Einfallswinkel φ . Licht mit der Wellenlänge λ wird von dem Gitter 64 in einem Lichtbündel 72 im wesentlichen in der Ebene eines Reihendetektors 74 fokussiert. Auf dem Reihendetektor 74 entsteht ein spektral zerlegtes Bild des Eintrittsspalt 68.

Das Gitter 64 ist ein holographisches Konkavgitter. Wenn

R der Krümmungsradius des Gitters 64, l_A der Abstand zwischen dem Eintrittsspalt und dem Gitter,

l_T die tangentielle Bildweite in der Zeichenebene von Fig. 5,

λ_0 die Laserwellenlänge bei der Herstellung des holographischen Gitters und

H_T die holographische Konstante

ist, dann ergibt sich für die tangentielle Bildweite in der Zeichenebene von Fig. 5 die Beziehung:

$$\frac{1}{l_T} = \frac{\cos^2 \varphi}{l_A} + \frac{\cos \varphi}{R} + \frac{\cos \psi}{R} + \frac{m \lambda}{\lambda_0} H_T \cos^2 \psi \quad (6)$$

Die tangentielle Bildweite ist daher eine Funktion der Wellenlänge und des Abstandes l_A des Eintrittsspalt 68 von dem Gitter 64:

$$l_T = f(l_A, \dots) \quad (7)$$

Die tangentielle Bildweite ändert sich daher in dem von dem Reihendetektor erfaßten Wellenlängenbereich und damit über die Länge des Reihendetektors hinweg. Typischerweise hat die Funktion einen Verlauf, wie er in Fig. 6 dargestellt ist. l ist dabei die Abweichung der Schärfefläche von der Ebene des Reihendetektors. Es erfolgt also eine scharfe Abbildung jeweils nur auf zwei oder drei Detektorelementen. Auch durch solche Unschärfen wird das Auflösungsvermögen des Spektrometers beeinträchtigt.

Bei der Ausführung nach Fig. 5 wird der Eintrittsspalt 68 geringfügig longitudinal, d. h. in Richtung des Lichtbündels 66 bewegt, wie durch den Doppelpfeil 75 in Fig. 5 angedeutet ist. Dadurch werden die Punkte 76, 78, 80, in denen der Eintrittsspalt 68 tangential scharf auf dem Reihendetektor 74 abgebildet wird, längs des Reihendetektors 74 bzw. längs der Wellenlängenskala verschoben. Das ist in Fig. 7 dargestellt. Auch hierdurch ergibt sich eine Änderung der Detektorsignale der einzelnen Detektorelemente in Abhängigkeit von der Bewegung des Eintrittsspalt 68.

Patentansprüche

1. Anordnung zur Verbesserung der Auflösung eines Spektrometers, bei dem durch dispergierende, optische Mittel ein Spektrum auf einem Reihendetektor mit einer Reihe von Detektorelementen erzeugt wird, **gekennzeichnet durch**

a) Mittel zur definierten periodischen Verlagerung des Spektrums relativ zu den Detektorelementen des Reihendetektors,

b) Mittel zur Erzeugung von Verlagerungssignalen nach Maßgabe der Verlagerung und

c) von den Detektorsignalen der Detektorelemente und den Verlagerungssignalen beaufschlagte Signalverarbeitungsmittel zur Darstellung eines Spektrums hoher Auflösung aus den Abhängigkeiten der Detektorsignale von den Verlagerungssignalen.

2. Anordnung nach Anspruch 1, dadurch gekennzeichnet, daß der Reihendetektor in seiner Längsrichtung periodisch bewegbar ist.

3. Anordnung nach Anspruch 1, dadurch gekennzeichnet, daß ein Eintrittsspalt, welcher über die dispergierenden Mittel in der Ebene des Reihendetektors abgebildet wird, quer zur Bündelachse peri-

odisch bewegbar ist, derart, daß sich das Spektrum periodisch gegenüber dem stillstehenden Reihendetektor in Längsrichtung des Reihendetektors bewegt.

4. Anordnung nach Anspruch 1, dadurch gekennzeichnet, daß die dispergierenden Mittel derart periodisch bewegbar sind, daß sich das Spektrum periodisch gegenüber dem stillstehenden Reihendetektor in Längsrichtung des Reihendetektors bewegt.

5. Anordnung nach Anspruch 1, dadurch gekennzeichnet, daß ein Eintrittsspalt, welcher über die dispergierenden Mittel in der Ebene des Reihendetektors abgebildet wird, in Richtung der Bündelachse periodisch bewegbar ist:

Hierzu 3 Seite(n) Zeichnungen

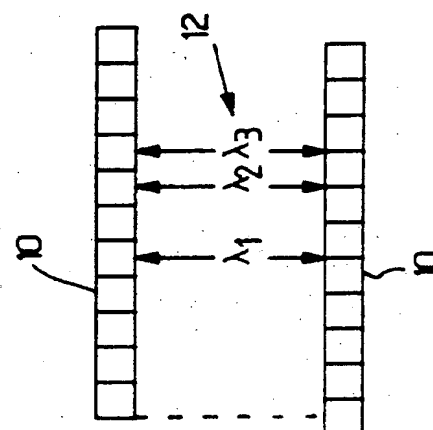
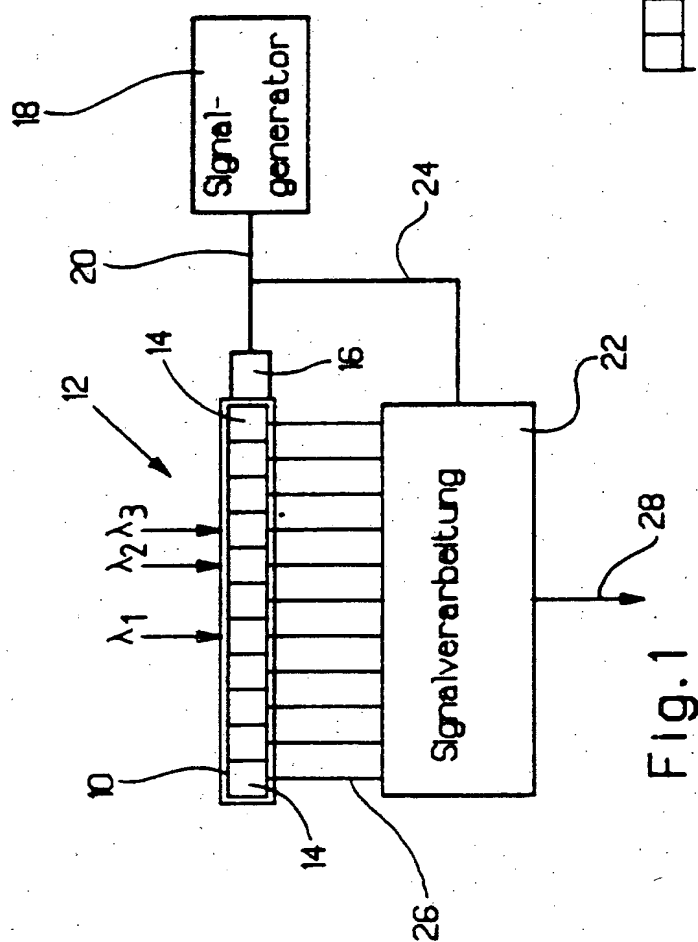


Fig. 2

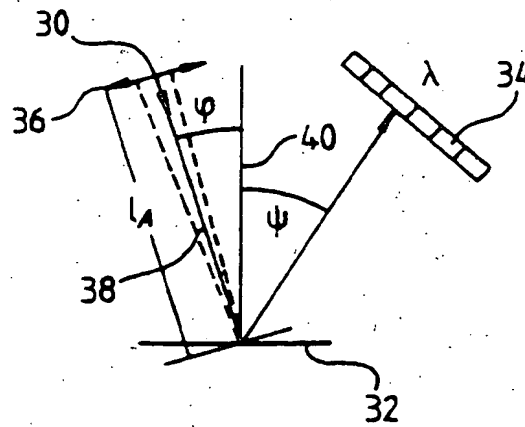


Fig. 3

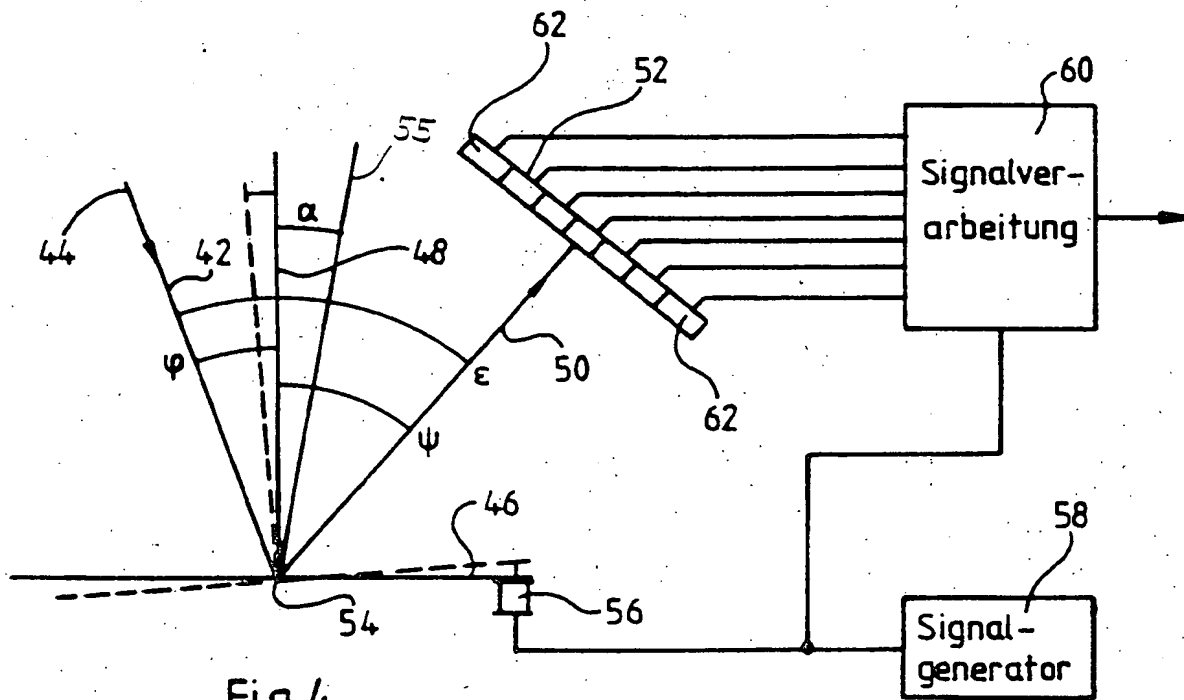


Fig. 4

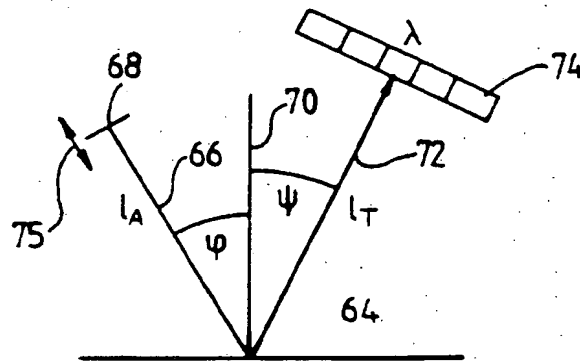


Fig.5

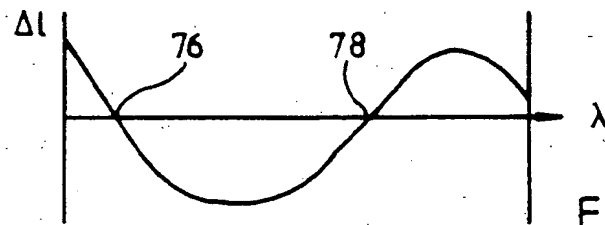


Fig.6

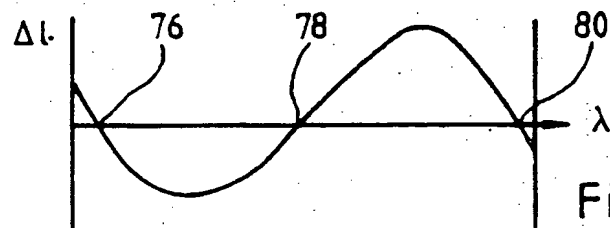


Fig.7